

матричного умножения и подбора коэффициентов, исходный спектр удается представить как сумму объёмного и поверхностного вкладов [1].

Факторный анализ использован для разделения спектров сечения неупругого рассеяния электронов. Подтверждена объёмная и поверхностная природа вкладов посредством возрастающей и убывающей зависимостей

Список публикаций:

- [1] Jin, H. *Measurement of optical constants of Si and SiO₂ from reflection electron energy loss spectra using factor analysis method* // *Journal of applied physics*. 2010. № 107. P. 083709, 1-11.
 [2] Игуменов А. Ю., Паришин А. С., Михлин Ю. Л. и др. Расчет вероятности генерации поверхностных возбуждений электронами, отраженными от поверхности Si // *Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета имени академика М. Ф. Решетнева*. 2014. Том 56 (4). С. 230-235.
 [3] Паришин А. С., Игуменов А. Ю., Михлин Ю. Л. и др. Сравнительный анализ спектров характеристических потерь энергии электронов и спектров сечения неупругого рассеяния в Fe // *Физика твердого тела*. 2016. Том 58 (5). С. 881-887.
 [4] Паришин А. С., Игуменов А. Ю., Михлин Ю. Л. и др. Исследование дисилицида железа методами электронной спектроскопии. // *Журнал технической физики*. 2016. Том 86 (9). С. 136-140.
 [5] Tougaard S. *Differential inelastic electron scattering cross sections from experimental reflection electron-energy-loss spectra: Application to background removal in electron spectroscopy* // *Phys.Rev. B*. 1987. Vol. 35 (13). P. 6570-6577.
 [6] QUASES – Software packages to characterize surface nano-structures by analysis of electron spectra. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.quases.com> (дата обращения: 09.04.2018)

Исследование спектра высокого разрешения полосы $4\nu_2$ молекулы H_2S

Чжан Фанцэ

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Улеников Олег Николаевич, д.ф.-м.н.

1946529618@qq.com

H_2S является одним из наиболее важных химических соединений, применяемым во многих областях химии, астрофизики, атмосферной оптики, планетологии и т.д. Как следствие, возникает необходимость в хорошем знании тонкой структуры спектров поглощения сероводорода в разных областях шкалы электромагнитных волн, в частности, в инфракрасном диапазоне.

Инфракрасный Фурье спектр молекулы H_2S был зарегистрирован в Техническом Университете Брауншвейга (Германия) в диапазоне $3400 - 10400 \text{ см}^{-1}$ с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS125HR, оснащенного оптической ячейкой из нержавеющей стали при температуре 294 К с давлением 20 мбар, эффективной длиной поглощения 163 м и спектральным разрешением $0,01 \text{ см}^{-1}$. На рисунке 1 проведен обзорный спектр в диапазоне $4400 - 5600 \text{ см}^{-1}$, в пределах которого расположены все полосы первой гексады $4\nu_2$, $\nu_1+2\nu_2$, $2\nu_2+\nu_3$, $2\nu_1$, $\nu_1+\nu_3$ и $2\nu_3$, а также указаны центры исследуемых полос.

Молекула H_2S является молекулой типа асимметричного волчка с параметром асимметричности $k = (2B-A-C)/(A-C) \sim 0,532$. Группа симметрии этой молекулы изоморфна точечной группе симметрии C_{2v} . Три колебательные координаты, q_1 , q_2 , q_3 , такого типа молекул преобразуются при операциях симметрии по неприводимым представлениям A_1 (координаты q_1 и q_2) и B_1 (координата q_3) [1-2]. В этой работе выполнено исследование полосы $4\nu_2$, правила отбора для переходов которой имеет следующий вид: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \pm (2n + 1)$; $\Delta K_c = \pm (2m + 1)$.

Как видно из рисунка 1, полоса $4\nu_2$ расположена достаточно изолированно относительно других полос, так что влияние остальных состояний первой гексады на колебательно-вращательную энергетическую структуру исследуемого состояния достаточно мало, вследствие чего для решения обратной спектроскопической задачи можно использовать модель эффективного гамильтониана изолированного состояния [3]. В этом случае гамильтониан имеет вид оператора Уотсона в A -редукции и I' представлении [3-4]:

$$\begin{aligned} H^{v,v} = E^v + & \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J_{xy}^2 \\ & - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 \\ & + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J_z^2 J^2 + h_J^v J^4] \\ & + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JKJ}^v J_z^4 J^4 + L_{KJJ}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J^8 \\ & + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J_z^4 J^2 + l_{JK}^v J_z^2 J^4 + l_J^v J^6]_+ + P_K^v J_z^{10} \end{aligned} \quad (1)$$

где J_α ($\alpha=x, y, z$) являются компонентами оператора углового момента, определённого в молекулярно-фиксированной системе координат; $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$; [..., ...]₊ обозначает антикоммутатор; E является центром полосы (колебательная энергия); A^v , B^v и C^v - вращательные постоянные, связанные с данным колебательным состоянием (v); Δ_K , Δ_{JK} , Δ_J и остальные параметры являются параметрами центробежного искажения различных порядков.

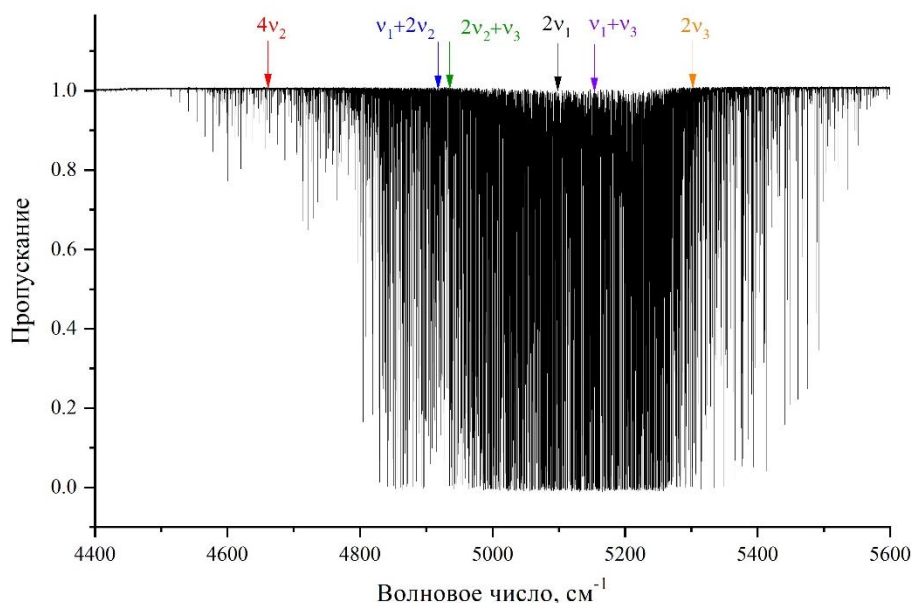


рис.1. Экспериментально зарегистрированный спектр в диапазоне 4400 – 5600 см^{-1} .

Интерпретация переходов была выполнена методом комбинационных разностей. По результатам анализа зарегистрированного спектра нами было проинтерпретировано 428 переходов, принадлежащих исследуемой полосе $4\nu_2$. Вращательные уровни основного колебательного состояния были рассчитаны с параметрами, взятыми из работы [5]. Максимальные значения квантовых чисел J и K_a для найденных в спектре линий равны 16 и 8. В результате решения обратной спектроскопической задачи был получен набор спектроскопических параметров.

Работа финансировалась за счет гранта РФФИ № 19-32-90069.

Список публикаций:

- [1] Bykov A. D., Lopasov V. P., Makushkin Yu. S., Sinita L. N., Ulenikov O. N., Zuev V. E. // *J. Mol. Spectrosc.* 1982. V. 94. P. 1-27.
- [2] Ulenikov O. N., He S. -G., Onopenko G. A., Bekhtereva E. S., Wang X. -H., Hu S. -M., Lin H., Zhu Q. -S. // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 204. P. 216-225.
- [3] Watson J. K. G. // *J. Chem. Phys.* 1967. V. 46. P. 1935-1949.
- [4] Flaud J. M., Perrin A., Salah L. M., Lafferty W. J., Guelachvili G. // *J. Mol. Spectrosc.* 1993. V. 160. P. 272-278.
- [5] Camy-Peyret C., Flaud J. -M., Lechuga-Fossat L., Johns J. W. C. // *J. Mol. Spectrosc.* 1985. V. 109. P. 300-333.

Исследование перекисного окисления аскорбиновой кислоты методом оптической спектроскопии

Чибинева Екатерина Сергеевна

Волгоградский государственный университет

Куценко Светлана Анатольевна, к.ф.-м.н.

chibineva2017@mail.ru

Известно, что аскорбиновая кислота, или витамин С легко окисляется кислородом воздуха. Особенно неустойчивы растворы этого соединения. Разработка методов повышения стабильности лекарственных препаратов на основе аскорбиновой кислоты и исследование процессов её окисления важная и актуальная задача. В данной работе приведены результаты исследования перекисного окисления аскорбиновой кислоты методом оптической спектроскопии.

В процессе реакции перекисного окисления: $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{C}_6\text{H}_6\text{O}_6$ восстанавливается кислород: $2\text{O}^- + 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{O}^{2-}$, окисляется углерод: $2\text{C}^+ - 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{C}^{2+}$, и образуется дегидроаскорбиновая кислота, которая в